

расширенного метода конечных элементов, который позволяет рассматривать произвольные точки разрыва без изменения вычислительной сетки. Второй применяемый тип моделей представляется кинетическими моделями Монте-Карло. Они базируются на дискретной основе — массиве диффундирующих, осаждающихся и движущихся в пространстве материала восстанавливающих частиц, чья пространственно-временная эволюция определяет кинетические процессы. Разработан алгоритм решения, в котором непрерывная модель метода конечных элементов отражает текущую атомную конфигурацию, получая обновления свойств элементов из модели метода Монте-Карло, которая использует параметры деформации для расчета межатомной геометрии и скоростей диффузии. Приводятся результаты моделирования самозалечивания трещин в нанокристаллических твердых телах под действием внешней механической нагрузки.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ОКИСЛЕНИЯ ВОДОРОДА И ХЕМОГЕНЕРАЦИИ ТОКА НА НАНОДИОДЕ ШОТТКИ

Д. В. Гранкин, доцент, ГВУЗ «ПГТУ»

Гетерогенные химические реакции на поверхности твердых тел (адсорбция, каталитические превращения) сопровождаются значительным энерговыделением, достигающим нескольких электрон-вольт на элементарный акт. Выделяющаяся энергия может передаваться электронной подсистеме твердого тела. Об этом свидетельствуют такие явления, как гетерогенная хемилюминесценция (ГХЛ) кристаллических поверхностей, эмиссия электронов в вакуум, электрический ток в нанодиодах Шоттки под действием реакции. Возникающий в реакциях хемоток можно использовать в качестве экспериментального инструмента для исследования гетерогенных процессов на поверхности, т.к. он несет информацию о газовом окружении, собственно о поверхности и физико-химических процессах на ней. Кроме того, актуальность исследования определяется идеей построения хемогенераторов тока на основе диодов Шоттки, в которых была бы реализована возможность непосредственной передачи энергии поверхностной химической реакции электронам металла (прямое преобразование химической энергии в электрическую). Нами создана модель и с помощью моделирования исследована реакция окисления водорода на палладии и хемогенерация тока в нанодиоде Шоттки (Pd/n-Si).

Модель включает обратимые стадии диссоциативной адсорбции молекул водорода и кислорода, необратимую стадию окисления

водорода по рекомбинационному механизму Ленгмюра-Хиншелвуда и стадию, описывающую переход адсорбированного атома водорода между активным и неактивным состояниями. В модели учтена пространственная неоднородность поверхности: реакция представлена, как идущая на нескольких автономных подрешетках, а результирующая скорость реакции определяется, как результат сложения скоростей реакций на всех подрешетках катализатора. Обоснованием модели являются имеющиеся в литературе экспериментальные и теоретические данные о взаимодействии водорода и кислорода с поверхностью палладия.

Сравнение результатов натуральных экспериментов с результатами, полученными в моделировании, показало, что введение всего нескольких подрешеток позволяет описать автоколебания хемотока сложной формы, наблюдаемые в опытах.

МЕТОДЫ ОБУЧЕНИЯ И ВИЗУАЛИЗАЦИЯ ИНФОРМАЦИИ

М. В. Долгая, старший преп. ГВУЗ «ПГТУ»

В современных источниках информации, обсуждающих проблемы и задачи образования, постоянно упоминаются информационные технологии, как некая панацея, которая должна непременно использоваться в процессе обучения для его совершенствования и повышения эффективности. Одним из таких способов повышения эффективности обучения является визуализация учебной информации. Но, такое уж новое это понятие и в чем именно его новизна. Известно, что под визуализацией понимают любые формы визуального, то есть образного, представления информации, активизирующего зрительное восприятие. Это и записи на доске ключевых понятий и формул, и графики и диаграммы, рисунки и схемы, и символические изображения, в которых концентрируются образы излагаемой информации, и любые другие изображения, иллюстрирующие изучаемый материал. Кроме того, это и демонстрация опытов «живьем», и показ фильмов. И все это не ново и появилось только сейчас с возникновением современных информационных технологий. Другое дело, что ИТ во многом упрощают и процесс подготовки наглядных материалов, и демонстрацию их в аудитории.

Целью данной работы был анализ роли, места, вида и степени визуализации в разных методах обучения для дальнейшего определения рекомендаций по оптимальному применению визуализации в учебном процессе.